

2013 年度 修士論文要旨

モンテカルロシミュレーションによる

A1の自由エネルギー計算

関西学院大学大学院理工学研究科

情報専攻 西谷研究室 細見有希

素材の設計を行う上で系の自由エネルギーを変えることは重要な要素である。第一原理計算におけるフォノン計算のパッケージが開発され、基礎状態の有限温度の予想が示された。第一原理計算は原理的に基底状態の計算である。そして有限温度の計算には、擬調和振動近似に基づいた phonon 計算のパッケージがいくつか開発されている。しかし、半導体や相変態温度近傍での振る舞いには、非調和の影響を取り込むことが不可欠である。だが現在、そのような計算パッケージは提供されていない。

このような計算には、有限温度での分子動力学シミュレーションが用いられる。しかし、自由エネルギーの絶対値は分子動力学シミュレーションからはほとんど得られない。一方、モンテカルロ・シミュレーションの分野では自由エネルギーを求める手段として Frenkel 法が存在する。Frenkel 法では自由エネルギーは、Einstein モデルの原子間ポテンシャルによって表される状態の、標準状態から遷移状態への直接積分によって得られた。

第一原理計算による Frenkel 法にはいくつかの課題がある。第一に Einstein モデルと現実の結晶を結びつける正確な方法、第二に系全体に起こる drift や rotation がある。前者に対しては、各原子と原子間ポテンシャルの連立方程式を解くことでアインシュタイン結晶と現実の結晶の、2つの系の独立した状態推移の後に生成されるエネルギーを詳細にすることを試みた。後者に対しては、複数の原子の drift や rotation を止めることを試みた。このようにして原子の動きを制限することによって、いくつかの自由度は凍結されるが、正準集団として正しく振る舞うことを確認した。